

Az atomi környezet hatása a rezonáns és nem rezonáns belsőhéj átmenetekre
Az OTKA 67873 sz. kutatási pályázat zárójelentése

Rezonáns és nem rezonáns belsőhéj átmenetek 3d átmeneti fémekben és ötvözeikben és oxidjaikban: foton-indukált elektronspektrumok mérése szinkrotronnál

A hamburgi DORIS III szinkrotron BW2 nyalábsatornáján működő THE-XPS (Tunable High Energy X-ray Photoelectron Spectroscopy) berendezéssel, nagy energiafelbontással megmértük fém Fe, Co, Cr és Mn rezonáns és nem rezonáns KLL, illetve nem rezonáns KLM Auger spektrumait, valamint Fe-Ni ötvözetek esetében a rezonáns és nem rezonáns Fe és Ni KLL Auger spektrumokat. A fém Fe és Co, valamint a Fe-Ni ötvözetek esetében az eddiginél (korábbi saját méréseinknél) pontosabban mértük meg a K-Auger spektrumokat. Megmértük a Si 1s és Ge 2s fotoelektronspektrumok részletes plazmaszerkezetét is a gerjesztő fotonok energiájának és a kilépő fotoelektronok szögének a függvényében. Mn, Co és Fe fém nanorétegek esetében a megfelelő rezonáns és nem rezonáns KLL, ill. nem rezonáns KLM Auger spektrumokat mértük érintő irányú röntgenbesugárással, nagymértékben lecsökkentve a szórt elektronok hatását és így elősegítve a spektrumokban tükröződő fizikai jelenségek megbízható azonosítását. Megmértük nagy energiafelbontással a Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu fémekből, illetve a Fe-Ni ötvözetekből (Fe₈₀Ni₂₀, Fe₅₀Ni₅₀ és Fe₂₀Ni₈₀) keltett 1s fotoelektronok spektrumait is. Az ötvözetek esetében a mért ötvözet-fém Auger paraméter eltolódások kísérleti hibái jelentős csökkentése céljából az ötvözet és a Fe, Ni fém referencia minták K-Auger és 1s, 2p fotoelektronspektrumait ezúttal azonos mérési beállításban, közvetlenül egymást követően mértük. A szinkrotronnál végzett méréseinkhez minden alkalommal sikeresen pályáztunk nyalábidőre, a nagymennyiségű mért adat teljes feldolgozása további éveket vesz igénybe.

A korábban mért MnO rezonáns Mn KLL Auger spektrumok értelmezésének könnyítésére megmértük a MnO Mn 1s fotoelektronspektrumát, nagy energiafelbontással. Egy további 3d átmeneti fém (Ti) különböző kristályszerkezetű (rutil, anatáz) nanoméretű oxidszemcséi elektronszerkezetének tanulmányozásához megmértük a részecskék kemény szinkrotron-röntgensugárással keltett Ti 1s, Ti 2p fotoelektron és Ti KLL Auger spektrumait nagy energiafelbontással a gerjesztett állapotok és az Auger-paraméterek meghatározása céljából.

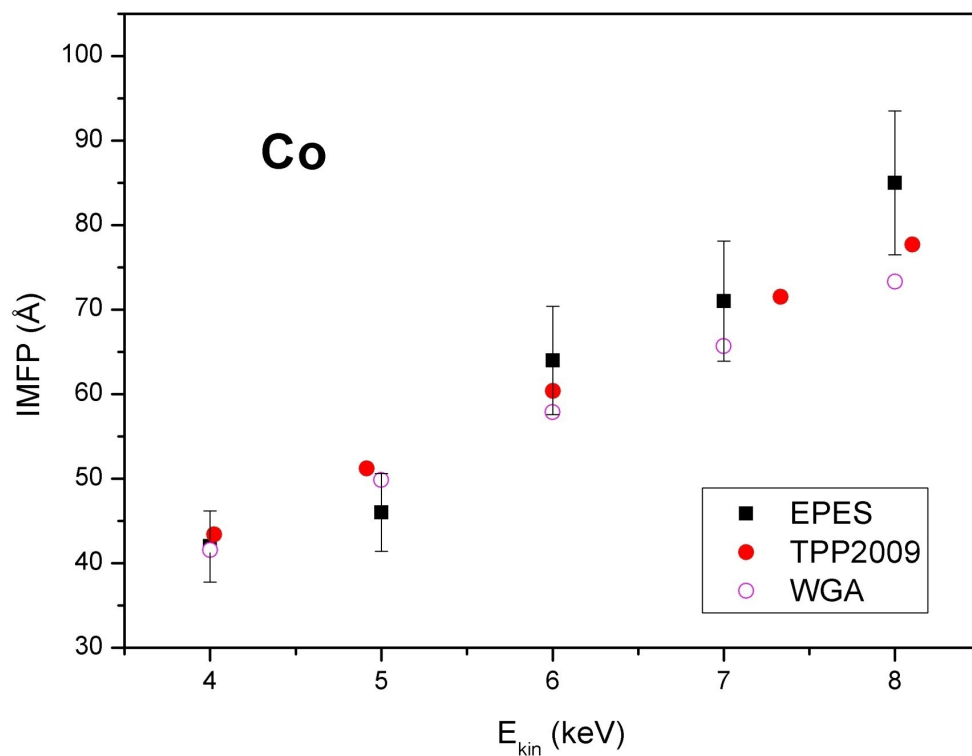
3d átmeneti fém és ötvözet mintákról visszaszórt elektronok spektrumainak mérése széles primer elektron energiatartományban a mintákban lezajló elektrontranszportot jellemző paraméterek meghatározása céljából

Debrecenben saját fejlesztésű ESA-31 elektronspektrométerünkkel nagy energiafelbontással megmértük a 4-8 keV tartományba eső energiájú primer elektronok esetében a fém Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu, valamint Fe-Ni ötvözet (Fe₈₀Ni₂₀, Fe₅₀Ni₅₀ és Fe₂₀Ni₈₀) mintákról Rugalmas Csúcs Elektronspektroszkópia (EPES) és Visszaszórt Elektron Energia Veszteségi Spektroszkópia (REELS) módszerek alkalmazásával a rugalmasan, illetve a rugalmatlanul visszaszórt elektronok spektrumait. A mérések célja a mintákban lezajló elektrontranszport-jelenségeket jellemző fizikai paraméterek és eloszlások meghatározása volt.

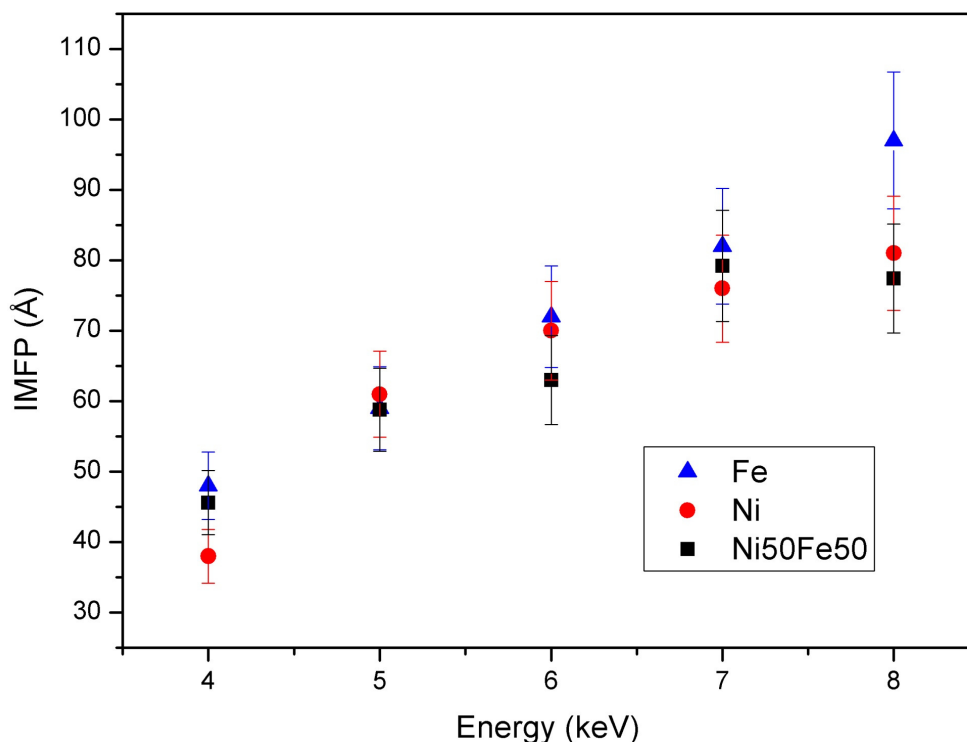
Az elektrontranszportot jellemző fizikai paraméterek és eloszlások meghatározása a mért visszaszórt elektronspektrumokból és modellszámításokkal 3d fémek és ötvözeik esetén

A minták felületi rétegeibe belépő, azokban haladó és onnan kilépő, illetve a mintákban keltett foto-és Auger elektronok szórási folyamatainak modellezésére, a mért EPES és REELS spektrumokból az elektronok rugalmatlan szórási közepes szabad úthosszának (IMFP) és az elektron energia veszteségi függvényeknek a meghatározására a szórásfolyamatok Monte Carlo szimulációján alapuló módszert és számítógépes programcsomagot fejlesztettünk ki [1, 2]. Elsőként alkalmaztuk a felülettől mért helytől függő differenciális rugalmatlan elektronszórási hatáskeresztmetszeteket (Li dielektromos válasz modelljén alapuló közelítésben) [1, 2]. A szimulációból kapott REELS spektrumok jól egyeznek a mért spektrumokkal, bizonyítva a kidolgozott modell érvényét. Mivel a modell képes elkülöníteni a mintán belüli tömbi és felületi gerjesztések hatásait, az egyszeres, mintán belüli felületi és tömbi gerjesztések spektrális járulékainak az elemzésére is módot ad. A felületi és tömbi elektrongerjesztések differenciális valószínűségének meghatározására a kísérleti REELS spektrumok különböző algoritmusokkal történő analízisével eljárást és szoftvert fejlesztettünk ki.

A mért EPES spektrumokból az általunk kifejlesztett, az elektronszórási folyamatokat Monte Carlo módszerrel szimuláló eljárás és szoftver alkalmazásával meghatároztuk a megfelelő IMFP értékeket a Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu fémek, valamint a Fe-Ni ötvözetek (Fe₈₀Ni₂₀, Fe₅₀Ni₅₀ és Fe₂₀Ni₈₀) esetében a 4-8 keV primer elektron energia tartományban [3-8]. Az 1. a) ábrán példaként a Co fémre, az 1. b) ábrán a Fe₅₀Ni₅₀ ötvözetre kapott IMFP értékeket mutatjuk be (az eredmények folyóiratcikkben történő publikálása folyamatban van). Ugyanzen 3d fémek és ötvözetek esetében két-két független, különböző primer elektron energia alkalmazásával mért kísérleti REELS spektrumból meghatároztuk az elektronok megfelelő energiaveszteségi függvényeit (tömbi és felületi elektron energiaveszteségi differenciális valószínűségi sűrűségfüggvények, nevezetesen a differenciális inverz rugalmatlan szórási közepes szabad úthossz, DIIMFP és a differenciális felületi gerjesztési paraméter, DSEP) [2, 9, 10]. A REELS spektrumokból származtatott DIIMFP eloszlásokat összehasonlítottuk a sűrűségfüggvény elméleten (DFT) alapuló számításainkból kapott és impulzusátadásra Penn módszerével kiterjesztett megfelelő DIIMFP eloszlásokkal.



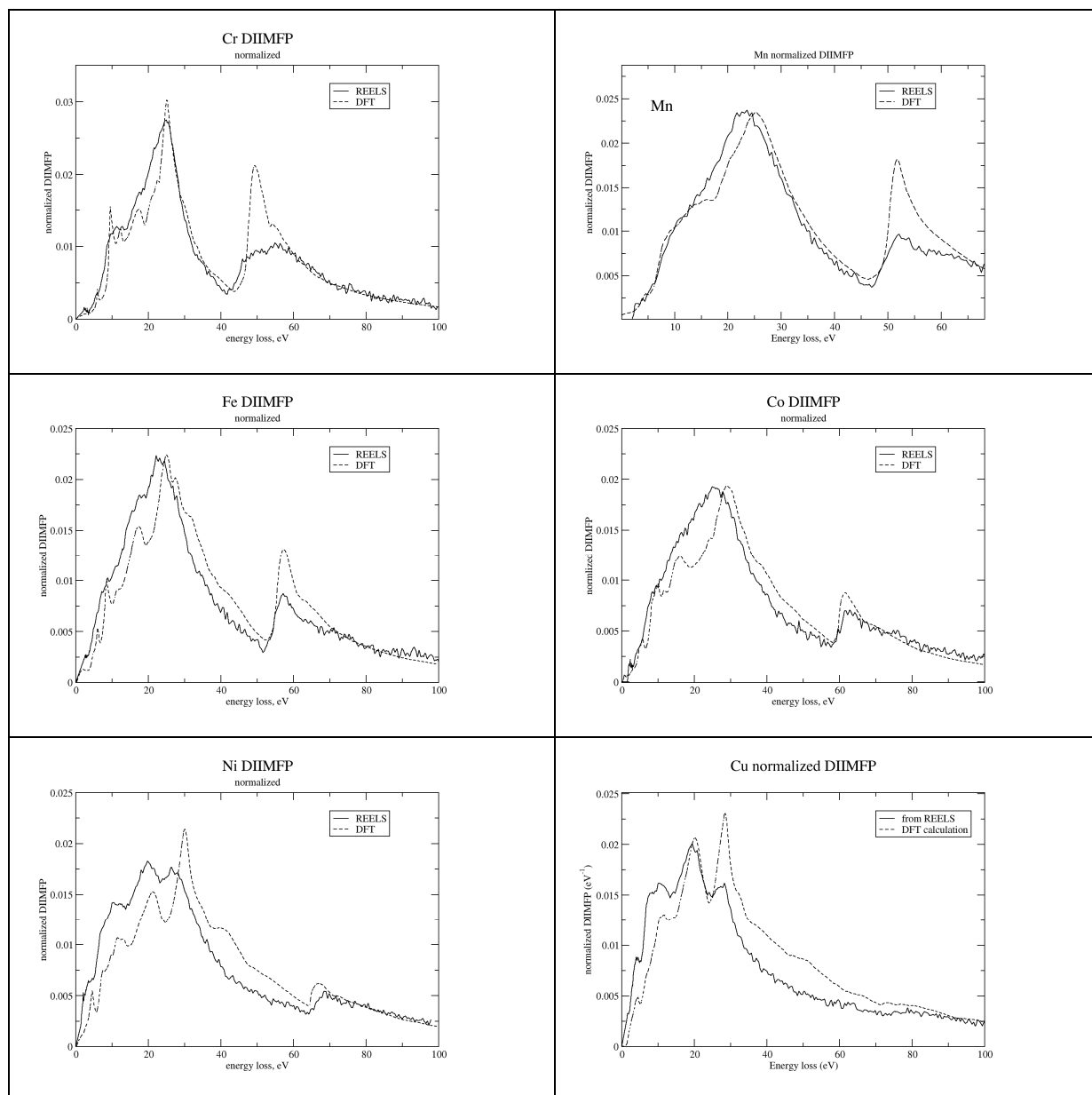
1. a) ábra: Az általunk EPES módszerrel meghatározott IMFP értékek Co fém esetén, összehasonlítva a Tanuma, Powell és Penn (TPP2009, S. Tanuma, C. J. Powell, D. R. Penn, SIA , in press DOI: 10.1002/sia.3522), ill. Werner, Glanschning és Ambrosch-Draxl (WGA, J. Phys. Chem. Ref. Data 38(2009) 1013.) modellszámításaival.



1. b) ábra: Az általunk EPES módszerrel meghatározott IMFP értékek Ni50Fe50 ötvözet esetén, összehasonlítva a Ni és Fe fémek esetén kapott értékekkel.

Sűrűségfunkcionál elméleten (DFT) alapuló számításokat végeztünk a Wien2k program [11] felhasználásával a Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu elemekre, végtelen, periodikus kristályrácsot feltételezve. A számításokból meghatároztuk a fenti elemek komplex dielektromos függvényét, amelyből leszarmaztatható az optikai energiaveszteségi függvény (ELF) is. Ez utóbbinak az egyszerű modellek (Penn, Ding) alapján impulzusátadásra is kiterjesztett változata közvetlenül összehasonlítható a kísérleti REELS spektrumokból meghatározott tömbi energiaveszteségi eloszlásfüggvénnyel (DIIMFP). A 2. ábrán a REELS mérésekből meghatározott normalizált DIIMFP és a DFT számításokból kapott dielektromos függvényből leszarmaztatott DIIMFP összehasonlítása látható (az optikai energiaveszteségi függvény impulzusátadásra történő kiterjesztését a Penn modell alapján végeztük). A kísérleti és a számolt mennyiségek eltérése a kisebb energiaveszteségek tartományában ($T < 40$ eV) a 3d elektronok számával növekvő tendenciát mutat, amit többelektron-hatás is okozhat, amit a független részecske közelítésen alapuló modellünk nem vesz figyelembe. További szisztematikus hibát okozhat az energiaveszteségi függvény impulzusátadásra történő kiterjesztésénél alkalmazott egyszerűsítő modellfeltevésünk, miszerint az energiadisziperzió kvadratikusság. Hasonló összehasonlításokat néhány elemre már mások is végeztek, azonban nem az impulzusátadásra kiterjesztett optikai veszteségi függvényt hasonlították össze a kísérleti adatokból kapott DIIMFP-el, hanem a kísérleti adatokból kapott DIIMFP-ből és a DSEP-ből próbáltak meghatározni egy parametrizált (Drude-Lindhard oszcillátor függvényekből felépülő) dielektromos függvényt.

Eredményeink publikálása folyamatban van.



2. ábra: A REELS mérésekből meghatározott normalizált DIIMFP és a DFT számításokból kapott dielektromos függvényből leszámaztatott DIIMFP összehasonlítása a 3d átmeneti fémek esetében.

A szóródó elektronok és a szilárdtestek rugalmatlan kölcsönhatásának kvantummechanikai közelítésén és a Monte Carlo modell alkalmazásán alapuló módszerrel meghatároztuk a Fe, Ni, Cu, Ti, Ag és Au fémek felületéről visszaszórt elektronok esetében a felületi korrekciós tényezőket (SCF) [13], vagyis annak a valószínűségét, hogy az elektronok nem gerjesztenek plazmonokat a felületen (kétszer) történő áthaladásuk során.

A röntgen-fotoelektron spektroszkópia (XPS) ultravékony felületi filmek tanulmányozására történő kvantitatív felületanalitikai alkalmazásai esetében gyakorlati szempontból hasznos, mind a rugalmatlan, mind a rugalmas elektronszórás hatását figyelembe vevő, a mérési geometriától, a film vastagságától és a fotoelektronok szögeloszlásától is (bár széles elektron emissziós szög és rétegvastagság tartományban csak gyengén) függő elektrontranszport

paraméter, az effektív gyengítési hossz (EAL) becslésére egyszerű közelítő formulát dolgoztunk ki. A formula a 2-15 keV elektron energiatartományban jól egyező EAL értékeket szolgáltat a korábbi, az elektronszórás Monte Carlo szimulációján, ill. a kinetikus Boltzmann egyenlet transzport közelítésben történő megoldásán alapuló formulákkal és a kevés számú kísérleti eredménnyel elemi szilárd minták, mint pl. a 3d átmeneti fémek esetében [14-18]. A Ni esetében szögfüggő nagyenergiájú XPS (Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy, HAXPES) méréssel kísérleti EAL értékeket határoztunk meg, amelyek jól egyeznek a különböző számítások által jósolt értékekkel [18, 19].

Az elektronok energiavesztésének lokális és nem lokális leírása az elektronok szilárd felületekről történő, plazmongerjesztéssel járó visszaszóródása esetén [20-23]

A Si felületi rétegekből visszaszóródott elektronok felületi és tömbi plazmongerjesztések okozta energiavesztési folyamatainak lokális és nem lokális leírása közötti különbségek kvantitatív elemzését végeztük el, mind realisztikus, mind pedig egyenes vonalú („V-alakú”) elektronpályákat feltételezve. Az eredmények világosan mutatják, hogy az interferencia (az elektron kölcsönhatása a pályáján korábban általa indukált elektromos térrel, realisztikus elektron trajektóriák esetén) effektusok csak a felületi plazmonok gerjesztését befolyásolják jelentősen. Ily módon a felületről visszaszóródott elektronok esetében az interferencia effektusok elhanyagolása nem okoz jelentősebb hibát 500 eV-nél nagyobb primer elektronenergiák esetén és a teljes (rugalmas és rugalmatlan elektronszórási folyamatokat is magában foglaló) elektrontranszport jól modellezhető az energiavesztési folyamat lokális leírásán alapuló Monte Carlo szimuláció segítségével [21]. Különböző primer elektron energiák (800 eV és 2000 eV) és szórási geometriák esetében a különböző (lokális és nem lokális) leírásmódokkal végzett számítások egyértelműen megmutatták, hogy az interferencia effektusok elhanyagolása kisebb hibát eredményez, mint a rugalmas elektronszórás hatásának a figyelmen kívül hagyása [23]. Ezek az információk fontosak a fotoelektronok és Auger elektronok transzportfolyamatainak Monte Carlo modellezése (lokális leírás) pontossága és megbízhatósága szempontjából is.

Az atomi visszalökődési folyamatok szerepe a rugalmas elektronszórási folyamatokban [24]

Az elektronok rugalmas visszaszórási folyamatainak teljesebb, az atomi visszalökődés hatásait is figyelembe vevő modellezésével nagy primer elektron energiák esetén értékes információt nyerhetünk a nagyenergiájú foto- és Auger elektronok transzportja során az atomi visszalökődés szerepének jelentőségéről is. Az Au-C kettős réteg mintákban végbemenő rugalmas elektronszórási folyamatoknak az atomi visszalökődési (recoil és Doppler) effektusokat is figyelembe vevő Monte Carlo szimulációjával modelleztük a reflexiós, ill. transzmissziós elektronszórási geometriában kapható, a mintában kvázi-rugalmasan szóródott elektronok spektrumait rögzített szórási szög (44.3°) és primer elektron energia (40 keV) esetén. A modell spektrumok és a megfelelő korábbi kísérleti spektrumok jól egyeznek, bizonyítva az alkalmazott modell érvényét [24].

Felület fölötti elektronszórás (super-surface scattering) és hatása a felületi gerjesztési valószínűség szögfüggésére [25]

A felülettől mért helytől függő differenciális rugalmatlan elektronszórási hatáskeresztmetszetek (Li dielektromos válasz modelljén alapuló közelítésben) alkalmazásán alapuló Monte Carlo számítások [1, 2] segítségével elsőként sikerült kimutatni, hogy 500 eV

primer energiájú elektronok Au filmről történő viaszszóródása esetén a felület közelében a vákuum oldalon történő felületi plazmon gerjesztés folyamatában a nem elhanyagolható impulzusátadás miatt a felületi gerjesztési valószínűség (SEP) értéke oszcillál az emissziós szög függvényében [25]. A MC modellszámítások által jószolt fizikai jelenséget a szögfüggő REELS és EPES kísérletek eredményei egyértelműen igazolták, a kísérleti adatokból kapott SEP szögeloszlás jól egyezik a MC modellel számított megfelelő szögeloszlással [25]. Az eredmények világosan demonstrálják, hogy a szilárdtest felületekről történő elektron-viaszszórás leírásában figyelembe kell venni nemcsak a felület közelében (a vákuum oldalon) a felületi gerjesztések miatti energiaveszteséget, hanem a rugalmatlan kölcsönhatás következtében fellépő irányváltozását is a primer elektronnak.

A mért Auger és fotoelektron spektrumok kiértékelése, a rugalmatlan elektronszórási háttér modellezése

Az előbbieken említett IMFP, DIIMFP, DSEP, SEP, ELF, az elektrontranszport fizikai folyamatainak jellemzői szükségesek az elektrontranszportnak a mért elektronspektrumokban tükröződő hatásai azonosításához és modellezéséhez.

A mért Cr, Mn, Fe és Co, valamint Ni és Cu K-Auger (rezonáns és nem rezonáns KLL, KLM) spektrumok kiértékeléséhez a REELS méréseinkből általunk meghatározott veszteségi függvények és korábbi kísérleti adataink felhasználásával, a Parciális Intenzitások Analízise módszerével [26] modelleztük a mintákban rugalmatlanul szóródott elektronoktól származó háttér járulékát. Feltételeztük, hogy a különböző típusú (tömbi, felületi, intrinsic) gerjesztések járulékaiknak levonása egymás után, függetlenül végezhető (az energiaveszteséget okozó folyamatok függetlennek tekinthetők, nincs köztük interferencia), valamint, hogy a minták sík felületűek, homogének és az elektronszórási folyamatok szempontjából végtelen vastagnak tekinthetők. A szükséges megfelelő parciális intenzitásokat a SESSA [27] program felhasználásával határoztuk meg.

A fém mintákban történő elektronszórás spektrális járulékait a legújabb és legpontosabb eredményt szolgáltató, Monte Carlo szimulációs módszeren alapuló dekonvolúciós eljárással távolítottuk el [2, 28]. A felületi és tömbi plazmonkeltések miatti elektron energiaveszteségek általunk használt valószínűségi sűrűségfüggvényeit (DIIMFP, DSEP) a független, ugyanazon a mintán végzett elektron viaszszórásos elektron energiaveszteségi spektroszkópiái (REELS) kísérleteink során kapott spektrumokból határoztuk meg. A mért és elektronszórási, ill. intrinsic (a kezdeti törzshéj vakancia hirtelen megjelenése okozta) kollektív gerjesztések következtében fellépő elektron energiaveszteségi folyamatokra az eddigieknél pontosabb módon (az 1s fotoelektronpektrumok kiértékelése során is alkalmazott DIIMFP és DSEP valószínűségi sűrűségfüggvények felhasználásával) korrigált, nem rezonáns Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu KLL és KLM Auger spektrumokból meghatároztuk a megfelelő nem rezonáns KLL és KLM Auger átmenetek relatív energiáit és intenzitásait.

Ge filmből keltett Ge 2s fotoelektronpektrum plazmonszerkezetének analízise egyszerű statisztikus modellel [29]

Az amorf Ge filmből monokromatikus szinkrotronsugárzással keltett Ge 2s fotoelektronpektrumban megjelenő plazmonszerkezetet elemeztük az általunk kidolgozott, az elektronok különböző típusú plazmongerjesztéseit függetlennek feltételező és a megfelelő energiaveszteségeket pontosan figyelembevevő, egyszerű statisztikus modellel. A modell

alkalmazásával meghatároztuk a tömbi, a felületi és az intrinsic plazmonok gerjesztési valószínűségeit és megmutattuk, hogy a Ge kísérleti REELS spektrumaiból származtatott energiavesztési függvényeket használva a modell bemenő adataiként, pontosabb értékek kaphatók a gerjesztési valószínűségekre, mint az optikai adatokból egyszerű dielektromos elmélet segítségével származtatott veszteségi függvények alkalmazásával [29]. Modellünk jól alkalmazható a szabad elektron-szerű anyagok elektronspektrumainak analízisére.

Elektron-korrelációs szatellitek 3d átmeneti fémek 1s fotoelektron spektrumaiban [10,30]

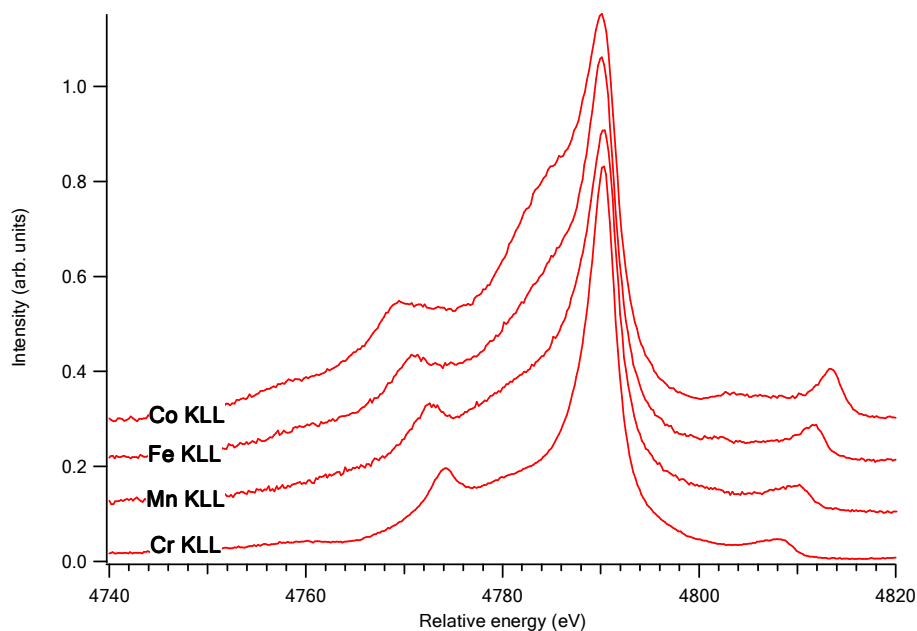
Elektron-korreláció hatásának tulajdonítható szatellit szerkezetek jelenlétét figyeltük meg a 3d átmeneti fémek (Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu) kemény szinkrotron-röntgensugárzással keltett 1s fotoelektron-spektrumaiban, (a Ni kivételével) elsőként. Az 1s fotoelektron spektrumok vonalalakjait nagy energiafelbontással mértük és a fotoelektron-spektrumok elméleti analízisét ab iníció számításaink alapján végeztük. A spektrumvonalak aszimmetriájának modellezéséhez az 1s fotoionizációt kísérő, a vezetési sávban történő elektron-vakancia pár gerjesztések leírásában szükséges elektronállapot-sűrűségeket DFT számításainkkal határoztuk meg a Wien2k programcsomag [11] alkalmazásával. A betöltött és betöltetlen állapotok sűrűségének az átmeneti mátrixelemekkel súlyozott konvolúciós integrálját (JDOS) használtuk az 1s fotoelektron spektrumvonal alakjának modellezéséhez.

A kísérleti eredményeinkből származtatott vonalalakokat az elméleti számításainkból kapott vonalalakokhoz hasonlítva, az 1s csúcs mért alakja a kis energavesztési tartományt is beleértve jól egyezik a modellszámításainkból kapott spektrumalakokkal, valamint a tanulmányozott 3d átmeneti fémek (Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu) minden 1s fotoelektron spektruma esetében jól kimutatható a rendszámtól függő energiatávolságú és energiakiszélesedésű (shake-up gerjesztésnek tulajdonítható) szatellit csúcs jelenléte [10, 30].

3d fémek nem rezonáns KLL és KLM Auger spektrumai

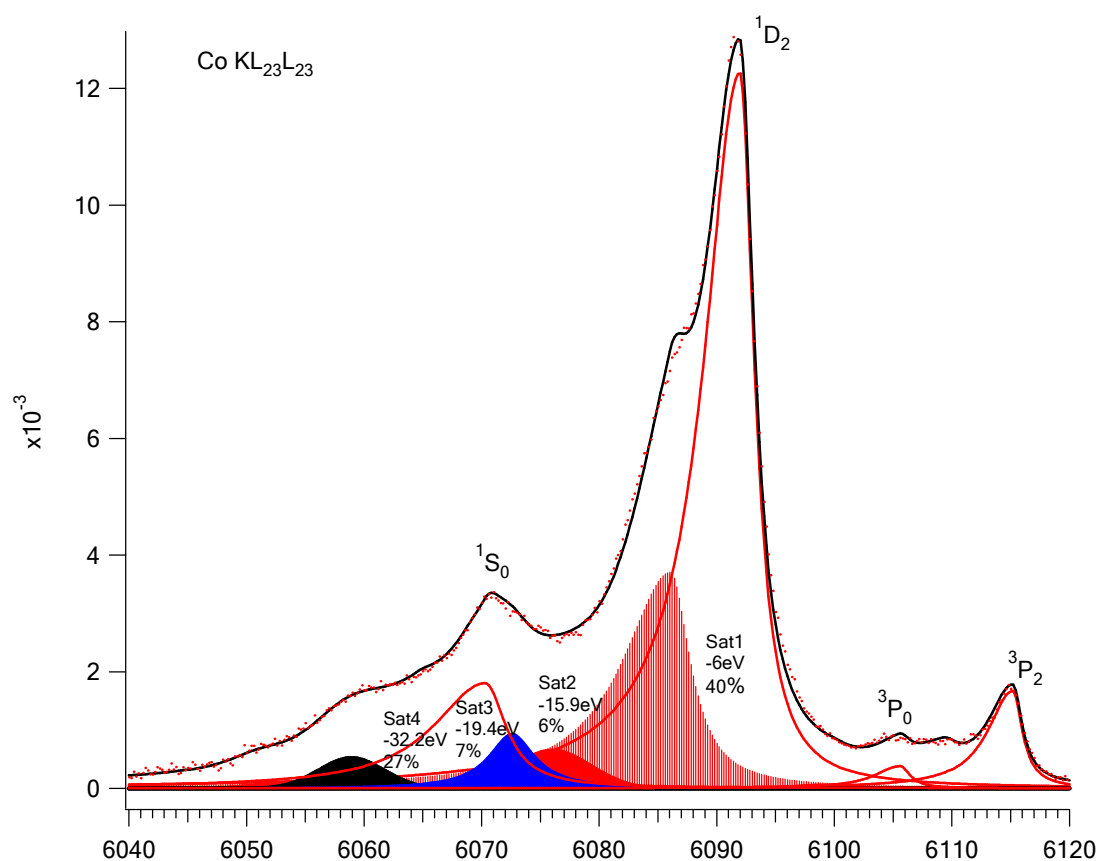
A mért nem rezonáns Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu KLL, valamint Cr, Mn, Fe, Co és Ni KLM Auger spektrumokat korrigáltuk az elektronszórás, ill. az intrinsic kollektív gerjesztések következtében fellépő elektron-energiavesztési folyamatok hatására. Ez az előzőekben ismertetett, az eddigieknél pontosabb módon történt (az 1s fotoelektron-spektrumok kiértékelése során is alkalmazott, a REELS spektrumainkból kapott DIIMFP és DSEP valószínűségi sűrűségfüggvények és korábbi eredményeink felhasználásával és a parciális intenzitások analízise módszerével). A korrigált spektrumokból meghatároztuk a megfelelő KLL Auger átmenetek relatív energiáit és intenzitásait. A háttérkorrekciót követően továbbra is erősen aszimmetrikus csúcsokat olyan összetett modell-csúcsokkal tudtuk megilleszteni, amelyek legnagyobb energiájú és intenzitású tagja aszimmetrikus Lorentz-alakú volt, kisebb kinetikus energiájú oldalán további - Gauss vagy Lorentz – eloszlás alakjával közelíthető alakú kisebb intenzitású szatellit csúcsok jelentkezhetnek. A spektrumok analízise a gerjesztő fotonnak a K-abszorpciós él energiahelyzetéhez viszonyított energiája függvényében történt. A spektrumok kiértékelésénél feltételeztük, hogy az esetleges szatellitek minden egyes diagram Auger vonal esetében ugyanolyan energiatávolságban és relatív intenzitással (a teljes spektrum intenzitására normáltunk) jelennek meg a spektrumokban. A Fe, Mn és a Cr KLL Auger spektrumok esetében a spektrumok alakja kevésbé (Fe), illetve alig észrevehetően (Mn, Cr) változik a gerjesztő foton relatív energiájának (10-50 eV) a függvényében. A korábban a Cu és Ni K-Auger spektrumokban azonosított, kezdeti állapotú (shake-up) gerjesztések következtében megjelenő intenzív szatellit-szerkezet hiányzik a fém Cr, Mn, Fe és Co minták K-Auger spektrumaiból, amint ezt a 3. ábrán látható spektrumok is igazolják. A K

abszorpciós küszöb fölötti, növekvő energiájú fotonokkal gerjesztett Co KLL spektrumok részletesebb analízise alapján azonban nem zárható ki néhány kisebb intenzitású szatellit megjelenése a küszöbhez közeli gerjesztő energiáknál.

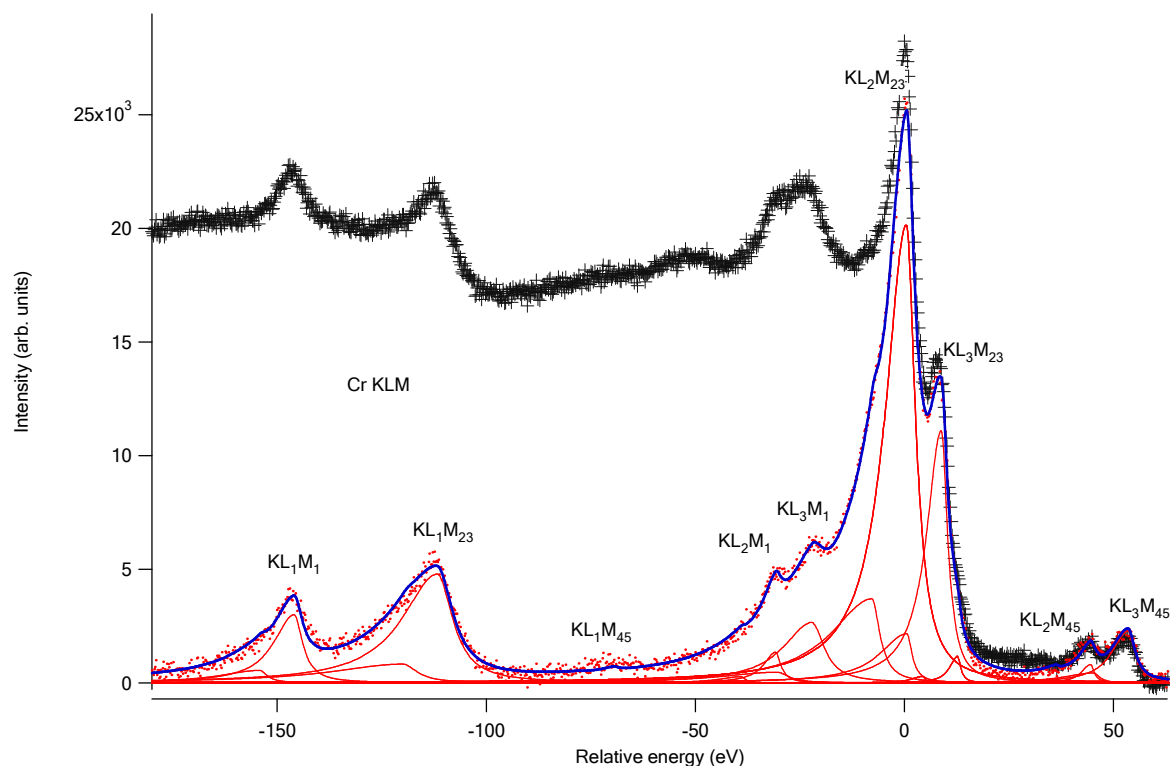


3. ábra: A rugalmatlan elektronszórási háttérre korrigált, mért nem rezonáns fém Cr, Mn, Fe és Co KLL Auger spektrumok.

A 4. és 5. ábrákon a spektrumok kiértékelésére példaként bemutatjuk a nem rezonáns, rugalmatlan háttérre korrigált Co KLL és Cr KLM Auger spektrumok kiértékelését az illesztett spektrummal és komponenseivel. Az eredmények értékelése, publikáció előkészítése folyamatban van.



4. ábra: A fém Co mért, rugalmatlan elektronszórási háttérre korrigált KLL Auger spektruma (pontok) és az illeszkedő modellspektrum a komponens vonalakkal (folytonos vonal). A diagram függőleges tengelyén az intenzitást (tetsz. egys.), a vízszintes tengelyen az elektronok kinetikus energiáját (eV) tüntettük fel.



5. ábra: A fém Cr mért (+) és a rugalmatlan elektronszórási háttérre korrigált KLM Auger spektruma (pontok), valamint az illeszkedő modellspektrum a komponens vonalakkal (folytonos vonal).

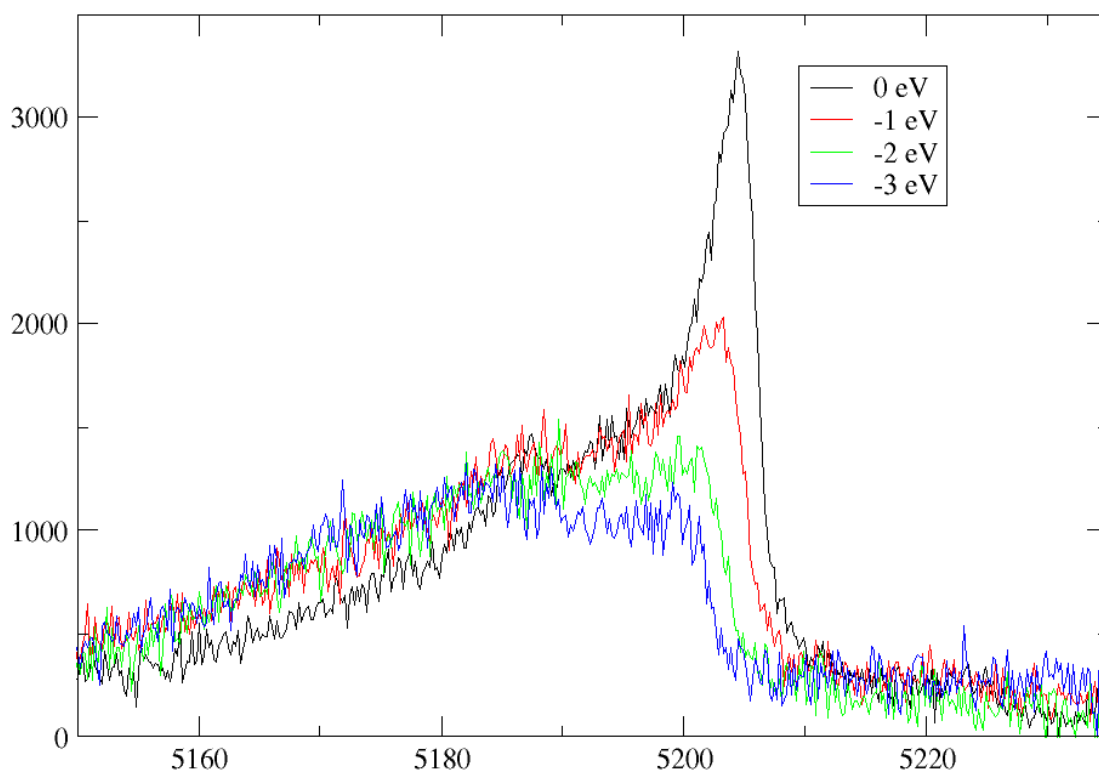
Töltésátadás meghatározása fém-ötvözet Auger-paraméter eltolódásokból NiFe ötvözetek esetén

A Fe-Ni ötvözetek (Fe₈₀Ni₂₀, Fe₅₀Ni₅₀ és Fe₂₀Ni₈₀) esetében klaszter molekulapálya módszerrel meghatároztuk az optimális lokális geometriát, a betöltött és betöltetlen elektronállapotok alapállapotú sűrűségét, valamint a Mulliken populációkat az ötvözet komponensei közötti töltésátadás származtatásához. Meghatároztuk az ötvözet komponensei közötti töltésátadást valamint kiszámítottuk a megfelelő betöltetlen elektronállapot-sűrűségeket a rezonáns KLL Auger spektrumok értelmezéséhez. Az ötvözetek és a fém referencia minták spektrumaiból az Auger-paraméter (AP) eltolódásokat, valamint a mért eltolódásokból az atomi struktúra modell alkalmazásával töltésátadás-értékeket származtattunk. Az ötvözet-komponensek közötti töltésátadásnak a DFT modellszámításainkból származtatott (igen kis, < 0.5 e) értékeit összehasonlítottuk az általunk mért Auger-paraméter eltolódásokból az atomi struktúra modell alkalmazásával kapott értékekkel. Eredményeink szerint a Fe₅₀Ni₅₀ és a Fe₂₀Ni₈₀ ötvözetek esetén a kezdeti állapotú, míg a Fe₈₀Ni₂₀ ötvözet esetén a végállapotú AP eltolódásokból származtatott töltésátadás értékek mutatnak kielégítő egyezést a modellszámításainkból kapott értékekkel [8, 17]. Az eredmények publikálása folyamatban van.

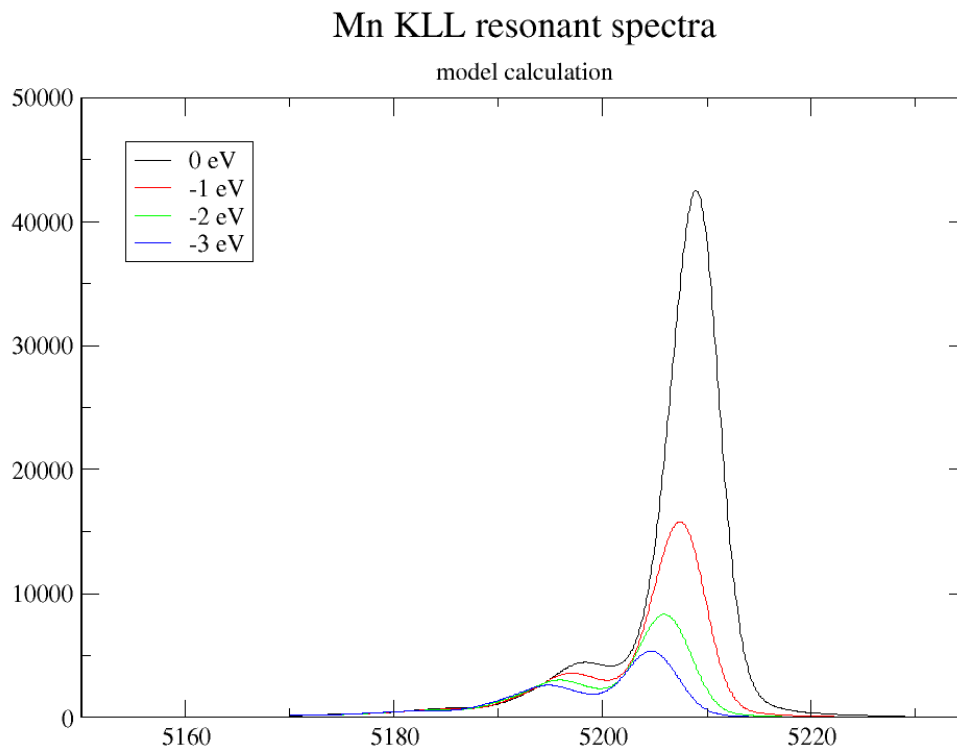
A 3d fémek rugalmatlan elektronszórás hatásaira korrigált kísérleti rezonáns KLL spektrumainak alakja eltér a korábban tanulmányozott rezonáns Cu és Ni KLL Auger spektrumok alakjától, pl. a főcsúcs alakja aszimmetrikus, a kisebb kinetikus energiák felé elnyúló. Ezt okozhatja az elektronszórás hatásainak kiszűrésére vonatkozó korrekció szisztematikus hibája, illetve a betöltetlen héjak következtében esetlegesen fellépő multipllett felhasadás. Ez utóbbi feltevést támasztják alá a Co és Mn nanorétegből gerjesztett rezonáns K-Auger spektrumaink alakjai is [31, 32], igazolva, hogy az említett eltérés oka nem kapcsolatos az elektrontranszport jelenségekkel.

Sűrűségfukcionál elméleten (DFT) alapuló számolásokat végeztünk a Wien2k program [11] felhasználásával a Cr, Mn, Fe, Co, Ni és Cu elemekre, végtelen, periodikus kristályrácsot feltételezve. A betöltetlen állapotok sűrűségét (DOS) használtuk fel ezen elemek rezonáns KLL Auger spektrumainak modellezéséhez, a betöltött és betöltetlen állapotok sűrűségének az átmeneti mátrixelemekkel súlyozott konvolúciós integrálját (JDOS) pedig az 1s fotoelektron spektrumvonal alakjának modellezéséhez. A rugalmatlan háttérre korrigált rezonáns KLL Auger spektrumokat összehasonlítottuk a klaszter molekulapálya módszerrel általunk meghatározott, megfelelő betöltetlen elektronállapot-sűrűségek és a rugalmatlan röntgen rezonanciaszórási modell alkalmazásával számított [33-38] spektrumokkal. A 6. és 7. ábrákon a fém Mn mért és modellszámítással kapott rezonáns KLL Auger spektrumai láthatók a gerjesztő fotonoknak a Mn K abszorpciós élhez viszonyított energiája függvényében. A korábbi munkánkban [33] kapott, Ni-re vonatkozó eredményekhez hasonlóan minden általunk vizsgált lezáratlan 3d héjú fém esetében találtunk szisztematikus eltéréseket a kísérleti és a modellezett rezonáns Auger spektrumalakok között. Ni, Cr és Mn esetén az egyezés részleges (a K ionizációs küszöb alatt a betöltetlen állapotok sűrűségéből számolt struktúrák azonosíthatók a kísérleti spektrumban is, de a főcsúcsához képesti arányuk alulbecsült). Fe és Co esetén jóval nagyobb az eltérés, s a Co spektrumokban a főcsúcs kettős szerkezete felhasadásra utal, vélhetően multipllett kölcsönhatás következtében, melynek leírására a független részecske közelítésen alapuló jelenlegi elméleti modellünk nem alkalmas. A jelenség pontosabb leírása tehát az alkalmazott modell továbbfejlesztését igényli. Eredményeink publikálása folyamatban van.

Mn KLL resonant spectra



6. ábra: A fém Mn mért rezonáns KLL Auger spektrumai a gerjesztő fotonoknak a Mn K abszorpciós élhez viszonyított energiája függvényében. A diagram függőleges tengelyén az intenzitást (tetsz. egys.), a vízszintes tengelyen az elektronok kinetikus energiáját (eV) tüntettük fel.



7. ábra: A fém Mn modellszámítással kapott rezonáns KLL Auger spektrumai a gerjesztő fotonoknak a Mn K abszorpciós élhez viszonyított energiája függvényében. A diagram függőleges tengelyén az intenzitást (tetsz. egys.), a vízszintes tengelyen az elektronok kinetikus energiáját (eV) tüntettük fel.

Szatellitvonalak gerjesztési függvényei (saellite evolution) 3d fémek KLL Auger spektrumaiban

A korábbi, a Cu és Ni K-Auger spektrumokban azonosított kezdeti állapot (shake-up) gerjesztések következtében megjelenő intenzív szatellit-szerkezet hiányzik a fém Cr, Mn, Fe és Co minták K-Auger spektrumaiból. A közvetlenül a K-abszorpciós küszöb fölötti, növekvő energiájú fotonokkal gerjesztett KLL spektrumok részletesebb analízise alapján azonban nem zárható ki néhány kisebb intenzitású szatellit megjelenése küszöb körüli gerjesztéseknél. [A Co esetében azonosított, a legintenzívebb (1D_2) diagram Auger vonalhoz képest közelebbi (-6 eV), ill. kicsit távolabbi (-16 eV) energiahelyzetű szatellitek intenzitása a foton-energia növekedtével kezdetben növekvő tendenciát mutat, majd telítésbe megy. Ez a változás jellemzi a kezdeti állapot gerjesztéseket.

A 3d átmeneti fémek KLL Auger (shake-up) szatellit átmeneteinek gerjesztési mechanizmusát (evolúciós függvényét) tanulmányozva a Cu és Ni fémek esetében, összehasonlítottuk a korábbi szemiempírikus modelleket és új, egyszerűbb modellt javasoltunk az evolúciós függvények leírására [39]. Mivel az addicionális vakancia keltésének mechanizmusa ugyanaz a megfelelő röntgenátmenetek esetében is, az eredmények alkalmazhatók a röntgen-szatellit vonalak tanulmányozásában is. Hasonló vizsgálatokat végeztünk a Fe és Zn fémek KL

röntgenspektrumaiban jelentkező szatellit vonalak evolúciós függvényét közelítve ugyanazokkal a szemimpírikus modellekkel, tisztázva a modellek fizikai alapjait és értelmezve a kötött állapotba történő elektrongerjesztés (shake-up) leírására kidolgozott modellek korlátozott alkalmazhatóságát a szabad állapotba történő gerjesztési folyamatok (shake-off) leírására [40].

3d fénoxidok KLL Auger és 1s fotoelektron spektrumai

A korábban mért MnO rezonáns Mn KLL Auger spektrumok értelmezésének elősegítésére és a lokális elektronszerkezetre vonatkozóan több információ szerzésére a MnO Mn 1s fotoelektronspektrumát tanulmányoztuk. Az 1s spektrumban szatellitok azonosíthatók, amelyek szerkezete hasonló a szintén a jelen projekt keretében tanulmányozott Ti oxid nanoszemcsék 1s, 2s, 2p fotoelektronspektrumaiban megjelenő szatellit-szerkezethez, amelyről megmutattuk, hogy nem elektronszórás következménye és a teljes szatelliteszerkezet nem értelmezhető a korábbi CTM (Charge Transfer Multiplet) számolások alapján [8].

Töltés-transzport folyamatok félvezető detektorokban

A félvezető detektorokban lezajló töltés-transzport folyamatok leírására és a detektorok áramjelének meghatározására 3 dimenziós Monte Carlo szimuláción alapuló modellt dolgoztunk ki, amely a töltéshordozókat kvázi-klasszikus részecskének feltételezi, az ütközésekben a kvantumos jelleg a szórási paramétereken keresztül jelenik meg. A modell a félvezető detektorokban a detektálandó sugárzás által keltett szabad, fölös töltéshordozóknak a begyűjtésük érdekében létrehozott elektromos tér által irányított, avagy nélküle történő mozgását korlátozó folyamatok részleteit írja le. Eddig még nem próbálták a töltésbegyűjtési folyamatokat a detektorokban ilyen részletes modellel leírni. A modellben a töltéshordozóknak a szennyezőkön való szóródását elhanyagoljuk, a kiürített tartományban elsősorban a fononokon történő szóródást vesszük figyelembe, a neutrális tartományban pedig a töltéshordozók egymáson történő szóródását is. A modell alkalmazható mind a „hagyományos“, Si (Li) és HPGe, mind a „modern” (Si pin, CdTe, CdZnTe, gyémánt, stb.) detektorokban lezajló folyamatok tanulmányozására. Mindkét esetre vonatkozóan meghatároztuk a töltéshordozókat érintő szórási folyamatok valószínűségeire, a szórási időkre és a szögeloszlásokra vonatkozó formulákat, valamint a kiürített térfogatra jellemző csapdázási és a térerőmentes tartományra jellemző rekombinációs folyamatok részleteit. Ezen kívül kidolgoztuk a megfelelő eloszlásokhoz szükséges véletlenszám - generáló algoritmusokat, valamint a szórási folyamatok leírására szolgáló Monte Carlo keretprogramot. A következő feladat a megfelelő szórási folyamatok modellezésének a MC programba való beillesztése volt. A program kidolgozása során beépültek a félvezető detektorokban a termikus elektronokra vonatkozó speciális szórási sajátosságok is. A programot a szilícium esetére teszteltük: a modell helyességét irodalomból vett kísérleti és MC szimulációs diffúziós és drift adatokkal ellenőriztük térerőmentes esetben, illetve homogén erőtér esetére. Ezek a mennyiségek ugyanis különösen érzékenyek a modell részleteire.

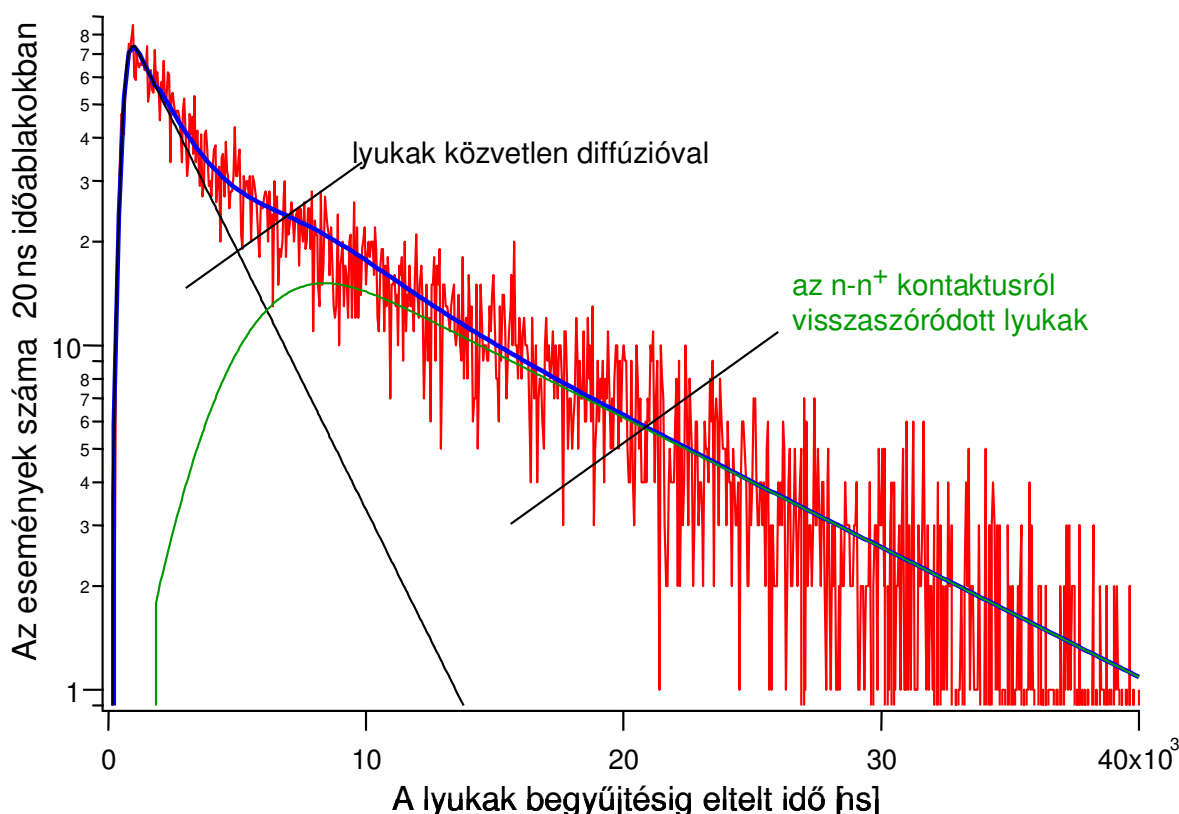
A modell segítségével elsősorban a detektorok áramjelének időbeli lefutását kívánjuk meghatározni és összehasonlítani a korábbi eredményekkel, valamint olyan, eddig nem vizsgált, de a detektorok működése szempontjából fontos jelenségek analízisét szeretnénk elvégezni, mint a retrodiffúzió a gyűjtőelektróda közelében, a drift-diffúzió a kiürített-neutrális tartomány határán, a diffúzió-rekombináció és a kisebbségi töltéshordozók

reflexiójának folyamatai. A kidolgozott modell közlésének előkészítése és a különböző típusú detektorok esetében történő alkalmazása folyamatban van.

A korszerű, mikroelektronikai technológiával készülő detektorok akár alapvető technológiai okokból, akár gyártási tökéletlenség miatt üzemi körülmények között nem elhanyagolható hányadban tartalmaznak „térrömentes” térfogatokat, amelyek hatása akár röntgen- vagy gamma-sugárzás, akár töltött részecskék esetén zavaró és a spektrumok kiértékelésénél figyelembe veendő [41-44].

Kísérleteinkben nemrég IBIC módszerrel (Ion Beam Induced Charge) vizsgáltunk szilícium pin-fotodiódákat [44]. A kiürített réteg vastagságánál nagyobb hatótávú ionok esetén a térrömentes tartományban keltett elektron-lyuk párok diffúziós mozgását a DTR- (Diffusion Time Resolved)-IBIC módszerrel követtük nyomon. Ennek okán modellünket és programunkat először erre az esetre alkalmaztuk. A kiürített térfogat különböző mélységeiből indítottunk egyesével (kisebbségi) töltéshordozókat Maxwell-Boltzmann energiaeloszlással. A hátsó kontaktust reflektáló tulajdonságúnak tekintettük. A detektor áramjelének a spektrum kialakulásában meghatározó jellege miatt az egyes töltések begyűjtési időinek eloszlását határoztuk meg. A csak „sima” diffúziót és a reflexiót is elszenvedett töltéshordozók járuléka az eloszlásban jól elkülöníthetőek, sőt külön-külön jól illeszthetőek

a $T(t) = \frac{1}{2} H_T \exp\left(\frac{t_0 - t}{\beta}\right) \exp\left(\frac{\sigma^2}{2\beta^2}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{t_0 - t}{\sigma} + \frac{\sigma}{\beta}\right)\right)$ függvénnyel [45].



8. ábra: Részlegesen kiürített Si pin-fotodióda térrömentes tartományának egy fix pontjából indított kisebbségi töltéshordozóknak a kiürített réteg határáig történő megérkezéséig eltelt időtartam- eloszlása a MC modellünkkel számolva.

Természetesen a térerőmentes esetre, sőt akár a “közönséges” detektorokban szokásos <10 kV/cm térerősség esetére is túlzásnak tűnik a szórások részleteit figyelembe venni. Távlati céljaink között azonban a jelenlegi kutatásaink tárgyát képező szilícium fotoelektronsokszorozók (SiPM = Silicon Photomultiplier) modellezése is szerepel, amelyek esetében 4-500 kV/cm térerősség is előfordul. A SiPM nagyérzékenységű szilárdtest fotodetektor, amely párhuzamosan kapcsolt miniatűr lavina fotodiódákból áll, melyek Geiger-Müller üzemmódban, a letörési feszültség fölött üzemelnek [46]. Nagy előnyük a vákuum fotoelektronsokszorozó csövekkel (PMT) szemben az, hogy érzéketlenek a mágneses térre. Jelenleg nemzetközi együttműködésben [47] az annak keretén belül fejlesztett SiPM fotodetektorok minősítésével és a rájuk alapozott, mágneses rezonancia képalkotó (MRI) berendezésbe integrálható kisállat PET készülék (pozitron emissziós tomográf) elkészítésén dolgozunk.

[1] Novák M: *Monte Carlo simulation of energy loss of electrons backscattered from solid surfaces*, Surface Science 602: 1458-1465, 2008

[2] Novák Mihály: *Szilárdtestek felületi rétegeiben zajló elektrontranszport folyamatok modellezése*, PhD értekezés, Debreceni Egyetem Természettudományi Kar, 2008

[3] Kövér L: *Progress in Spectroscopy of High Energy Electrons and Related Applications*, Invited talk, p. 19 in the Technical Program of the IUUSTA Highlight Seminar and Midwest AVS Symposium, April 20-21, Univ. of Illinois, Champaign-Urbana, 2009, 2009

[4] Kövér L: *Some problems of quantitative applications of high (up to 15 keV) energy x-ray photoelectron spectroscopy*, Oral contribution. Abstracts (Paper_AS-WeM4, p.119), AVS (American Vacuum Society) 56th International Symposium and Exhibition 2009. San Jose, USA, 8-13 Nov., 2009, 2009

[5] Kövér L; Novák M; Cserny I; Tóth J; Varga D; Egri S; Drube W: *Energy dependence of the parameters determining spectra of high (2-15 keV) energy electrons photoexcited from solids*, Oral contribution. Book of Abstracts, p. 232, 13th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis. ECASIA 09. Antalya, Turkey, 18-23 Oct., 2009, 2009

[6] Kövér L: *Perspectives for photoelectron spectroscopy of solids using hard X-rays for excitation*, Invited talk, Program and Abstracts, p. 57, 4th Yamada Symposium on Advanced Photons and Science Evolution. Osaka, Japan, 14-18 June, 2010, 2010

[7] Kövér L; Novák M; Cserny I; Tóth J; Varga D; Jánosfalvi Zs; Egri S; Drube W: *Quantitative applications of high (up to 15 keV) energy electron spectroscopy*, Oral contribution. No. ASS2-O-1 (p. 50) Program Book of the 18th International Vacuum Congress. IVC 18. Beijing, China, 23-27 Aug., 2010, 2010

[8] Kövér L; Cserny I; Zommer L; Tolnai Gy; Novák M; Jánosfalvi Zs; Egri S; Csik A; Drube W; Thiess S: *Quantitative applications of hard X-ray photoelectron spectroscopy*, Oral Contribution. Programme and Abstracts, p. 74, 14th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis (ECASIA 11). Cardiff, UK, 4-9 September 2011, 2011

- [9] Novák M: *Determination of probability density functions for electron energy loss from measured REELS spectra: Advanced algorithms, their mathematical background and implementation*, Oral contribution. Book of Abstracts, p. 233, 13th European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis. ECASIA 09. Antalya, Turkey, 18-23 Oct., 2009, 2009
- [10] Novák M; Kövér L; Cserny I; Egri S; Tóth J; Varga D: *Accurate determination of 1s photoelectron line shapes of 3d transition metals using Monte Carlo method based deconvolution techniques for quantitative analysis of XPS and REELS data*, Oral Contribution. No ASS4-O-9 (p. 53), Program Book of the 18th International Vacuum Congress. IVC 18. Beijing, China, 23-27 Aug., 2010, 2010
- [11] Blaha P; Schwarz K; Madsen G; Kvasnicka D; Luitz J: *WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties*, (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria), 2001. ISBN 3-9501031-1-2
- [12] W.S.M. Werner W.S.M; Glantschnig K; Ambrosch-Draxl C: *Optical Constants and Inelastic Electron Scattering Data for 17 Elemental Metals*, J. Phys. Chem. Ref. Data **38**, 1013 (2009)
- [13] Salma K; Ding Z J; Zhang Z M; Zhang P; Tökési K; Varga D; Tóth J: *Quantification of surface effects: Monte Carlo simulation of REELS spectra to obtain surface excitation parameter*, Surface Science 603; 1236-1243, 2009
- [14] Kövér L: *Electron spectra excited by hard X-rays from solids: parameters characterizing electron transport phenomena*, Invited talk, pp 31-32 in Book of Abstracts, 55th IUVSTA Workshop on Electron Transport Parameters Applied in Surface Analysis, Sept 14-17 Siófok, 2008
- [15] Kövér L.: *Effective Attenuation Lengths for High (up to 15 keV) Energy Photo- and Auger Electrons in Several Elementary Solids*, Journal of Surface Analysis 15: 177-185, 2008
- [16] Kövér L: *X-ray photoelectron spectroscopy using hard X-rays*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena 178-179; 241-257, 2010
- [17] Kövér L.: *Progress in hard X-ray photoelectron spectroscopy of solids*, pp. 142-152 in : Proceedings of the International Conference of the JSPS 141 Committee on Microbeam Analysis. Nagoya, Japan, 30-31 Aug, 2010. Invited talk, 2010
- [18] Kövér L; Zommer L; Cserny I; Csik A; Egri S; Drube W; Thiess S: *Effective Attenuation Lengths in Ni for AR-HAXPES*, HASYLAB Annual Report 2011 (közlésre elfogadva), 2012
- [19] Kövér L; Cserny I; Csik A; Drube W; Thiess S: *AR-HAXPES for determining Effective Attenuation Length of electrons*, HASYLAB Annual Report 2010 Vol. 1. 782-3, 2011
- [20] Novák M: *Effects of interference and elastic scattering on electron transport in the near surface region of solids: simulations using different models*, Oral contribution. pp 35-36 in Book of Abstracts, 55th IUVSTA Workshop on Electron Transport Parameters Applied in Surface Analysis, Sept 14-17 Siófok, 2008

- [21] Novák M: *Local versus nonlocal description of the energy loss of electrons via plasmon excitation backscattering from solid surfaces*, Physical Review B 80; 045406-1-7, 2009
- [22] Novák M: *Szilárdtestek felületi rétegeiben zajló elektrontranszport folyamatok Monte Carlo szimulációja*, Program: Újabb eredmények a kondenzált anyagok fizikájában, az MTA Fizikai Tudományok Osztályának tudományos ülése, Budapest, 2009 máj. 7. Meghívott előadás, 2009
- [23] Novák M: *On the role of the effects of interference and elastic scattering in reflection electron energy loss spectra: simulations using different approaches*, Journal of Physics D: Applied Physics 42; 225306-10, 2009
- [24] Tökési K; Varga D: *Energy distributions in quasi-elastic peak electron spectroscopy*, Surface Science 604; 623-626, 2010
- [25] Werner WSM; Novák M; Salvat-Pujol F; Zemek J; Jiricek P: *Electron super-surface scattering on polycrystalline Au*, Közlésre beküldve (Phys. Rev. Lett.), 2012
- [26] Werner W. S. M: *Electron transport in solids for quantitative surface analysis*, Surf. Interface Anal. Vol. 31, 141–176 (2001)
- [27] Smekal W; Werner W. S. M; Powell C. J: “*Simulation of electron spectra for surface analysis (SESSA): a novel software tool for quantitative Auger-electron spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy*”; Surf. Interface Anal., **37**, 1059(2005).
- [28] Novák M; Kövér L; Drube W; Cserny I; Tóth J; Varga D; Egri S; Thiess S: *Electron correlation satellites in 1s photoelectron spectra of 3d transition metals*, Beküldésre előkészítve (Phys. Rev. B), 2012
- [29] Novák M; Kövér L; Egri S; Cserny I; Tóth J; Varga D; Drube W: *A simple statistical model for quantitative analysis of plasmon structures in XPS and Auger spectra of free-electron-like materials*, J Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 163: 7-14, 2008
- [30] Novák M; Egri S; Kövér L; Cserny I; Drube W; Tóth J; Varga D: *Extracting information on electronic structure from 1s photoelectron spectra excited by synchrotron radiation from Fe metal*, Program: HASYLAB Users' Meeting, 30. 1. 2009, HASYLAB/DESY, Hamburg (poszter), 2009
- [31] Kövér L; Cserny I; Drube W; Novák M; Egri S; Thiess S: *Resonant KLL Auger spectra excited from a Co nanolayer*, HASYLAB Annual Report 2008 504-5, 2008
- [32] Kövér L; Cserny I; Drube W; Egri S; Jánosfalvi Zs; Thiess S: *Resonant KLL Auger spectra excited from a Mn nanolayer*, HASYLAB Annual Report 2009 725-26, 2010
- [33] Kövér L; Drube, W; Berényi Z; Cserny I; Medicherla V. R. R; Ishii T; Ikeno H; Adachi H: *KLL Auger resonant Raman transition in metallic Cu and Ni*, Surface Science 601; 1085, 2007

- [34] Kövér L; Cserny I; Drube W; Egri S; Jánosfalvi Zs; Thiess S: *Resonant KLL Auger spectra excited from a Mn nanolayer*, HASYLAB Annual Report 2009 725-26, 2010
- [35] Kövér L.: *Local Electronic Structures from Analyzing and Modeling High-Energy Auger and Photoelectron Spectra of Solids*, Advances in Quantum Chemistry 54: 175-191, 2008
- [36] Kövér L.: *Surface and Interface Analysis using High Energy Electron Spectroscopy*, Journal of Surface Analysis 14: 391-397, 2008
- [37] Kövér L.: *Studies of electronic structure of solids using spectroscopy of electrons excited by hard X rays* (Invited talk), pp 77-84 in Proceedings of 3rd Japan-Hungary Joint Seminar on Physics in Modern Science and Technology, Debrecen-Szeged-Budapest Oct 8-12 2007. Publisher: IAS (Kyoto), 2008
- [38] Kövér L: *Felületi és határréteg-szerkezetek tanulmányozása nagy (2-15 keV) energiájú elektronok spektroszkópiájával*, Meghívott előadás. Program: A szinkrotronsugárzás alkalmazása az anyagtudományban és a kémiai szerkezetkutatásban, tudományos ülés (MTA), Budapest, 2008 máj. 7. 2008
- [39] Mukoyama T; Uda M; Kövér L; Berényi Z; Cserny I; Drube W: *Evolution of satellite lines*, X-ray Spectrometry 38; 138-143, 2009
- [40] Mukoyama T; Uda M; Kövér L: *Comparison of models for evolution of X-ray satellite lines*, X-ray Spectrometry 38; 406-409, 2009
- [41] Kalinka G; Papp T: *Spectral artefacts with a Si-pin photodiode x-ray detector: I. The low energy case*, Atomki Annual Report 2001, 62, 2002
- [42] Kalinka G; Papp T; Hegyesi Gy: *Spectral artefacts with a Si-pin photodiode x-ray detector: II. The high energy case*. Atomki Annual Report 2001 (2002) 63
- [43] Simon A; Kalinka G: *Investigation of charge collection in a silicon PIN photodiode*, Nuclear Instruments and Methods B 231 (2005) 507
- [44] Kalinka G; Novák M; Simon A; Pastuović Ž.; Jakšić M; Kiss Á. Z: *Empirical approach to the description of spectral performance degradation of silicon photodiodes used as particle detectors*, Nuclear Instruments and Methods B 267 (2009) 2203
- [45] Campbell, J. L., Maxwell, J. A.: *A cautionary note on the use of the Hypermet tailing function in X-ray spectrometry with Si(Li) detectors*, Nuclear Instruments and Methods B 129, 297 (1997)
- [46] Renker D: *Geiger-mode avalanche photodiodes, history, properties and problems*, Nuclear Instruments and Methods A 567,48(2006)
- [47] „CSI: Central Nervous System Imaging, 2010-2013”, az ENIAC (European Nanoelectronics Initiative Advisory Council) egy magas prioritású alprogramja.